Funktionalisierte Fasern für zementgebundene Werkstoffe

FunktionalFaser

Teilvorhaben IONYS AG:
Chemische Grundlagen und Funktionalisierung der Faseroberflächen

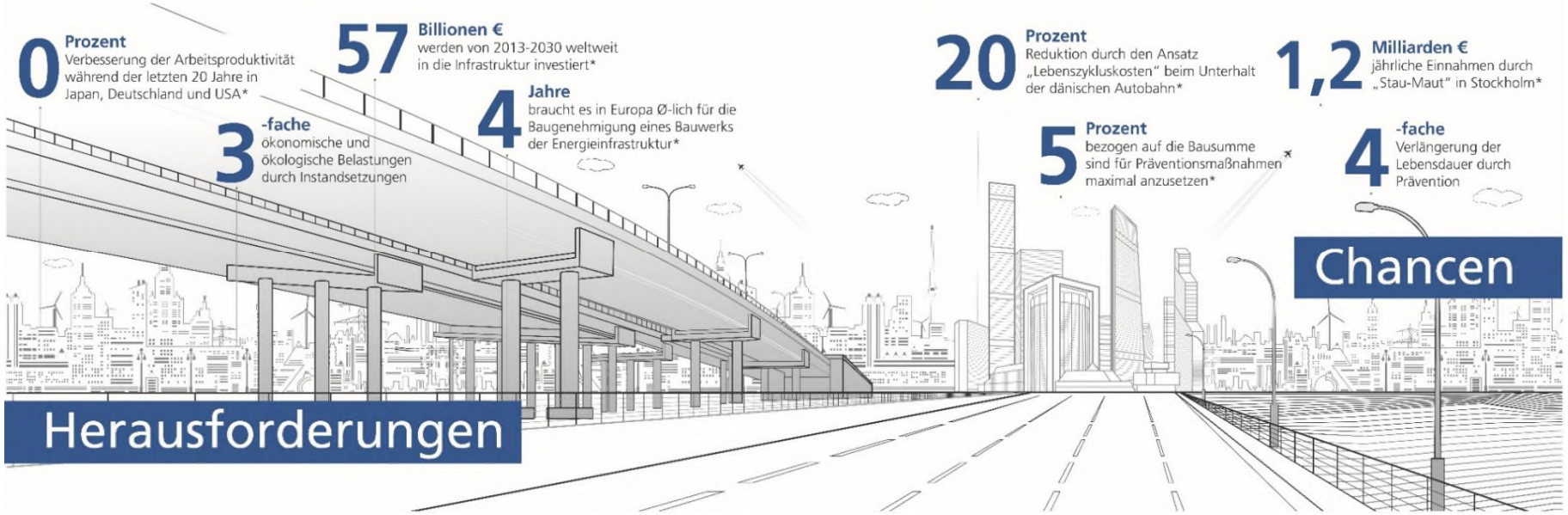
Teilvorhaben BAM
FaserPerformance

BAM
Bundesanstalt für
Materialforschung und Prüfung
Unter den Eichen 87
12205 Berlin

IONYS AG
Nördliche Uferstraße 8
D-76189 Karlsruhe
E-Mail: info@ionys.de
Internet: www.ionys.de

Technische Infrastruktur – vielfältig und unverzichtbar

Technische Infrastruktur – Zahlen und Fakten



* Quelle: McKinsey Global Institute, January 2013, www.mckinsey.com/mgi

Technische Infrastruktur – Herausforderungen des 21. Jahrhunderts

„Megacities“

Globalisierung

Construction 4.0

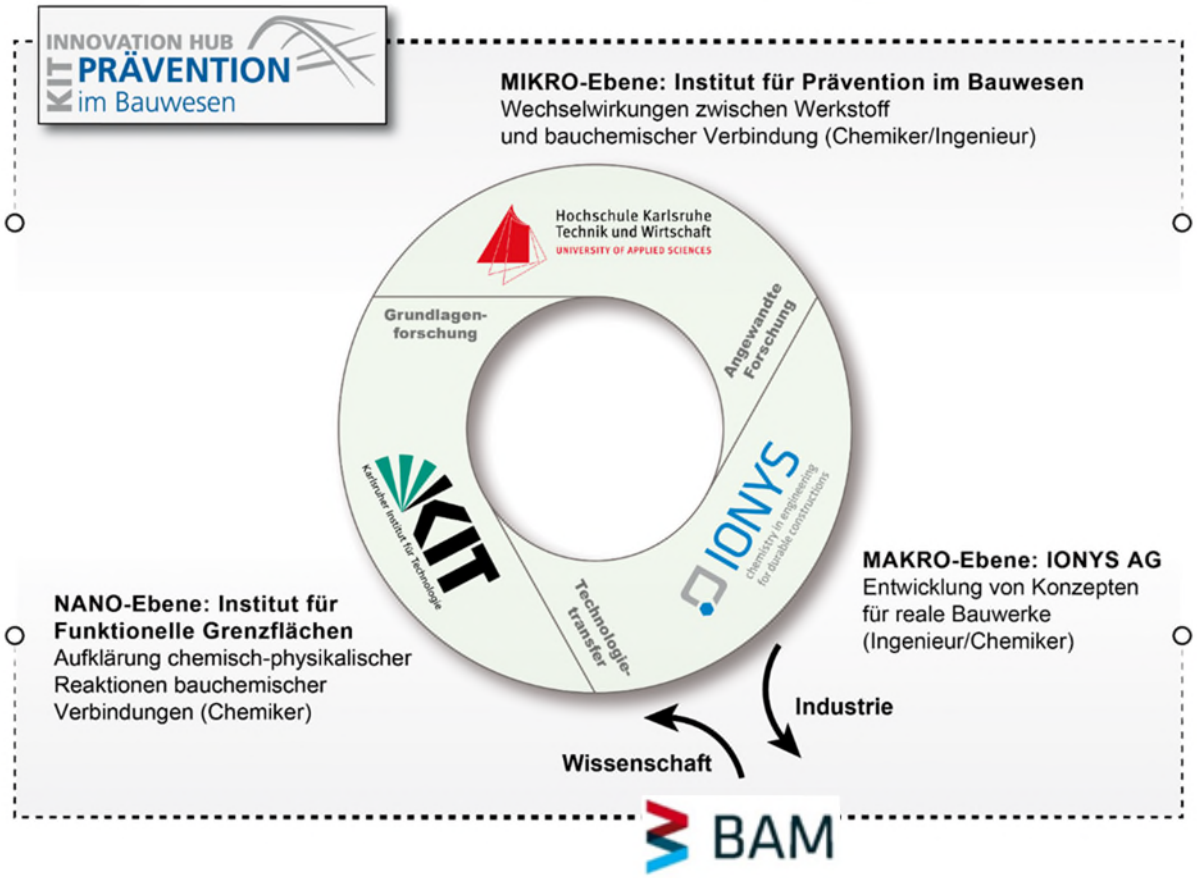
Ressourcen

Klimawandel

Herausforderungen & Chancen

- Verkürzte Lebensdauer bei der Infrastruktur
- Instandsetzungen sind mit erheblichen technologischen, ökologischen und ökonomischen Belastungen verbunden
- Disruptive Innovationen für das Bauwesen notwendig!

Umsetzung des Forschungsansatzes „ … von Nano zu Makro …“



Entwicklungsstrategie - Pharmazie

Entwicklung „grenzflächenaktiver Pharmazeutika“

„Target“ -Identifikation: Bestimmung der Bindungsstellen

↓

„Screening“: Suche von geeigneten Wirkstoff-Molekülen

↓

Modellierung: Optimierung der ausgewählten Strukturen

↓

Medizinische Chemie: Verfeinerung und Optimierung der Wirkstoffmoleküle

↓

Pharmakologie und Toxikologie: Testen der Wirkstoffmoleküle

↓

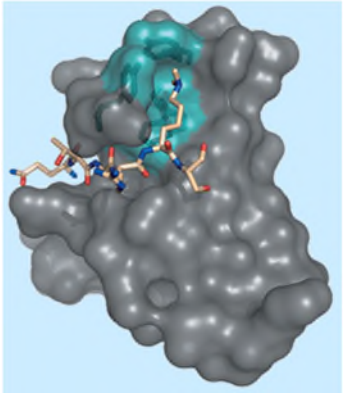
Formulierung der Medikamente: Entwicklung der Darreichungsform

↓

Klinische Phase: Wirksamkeitsstudie

↓

Lizensierung: Verkaufsprodukt



Kessler, H. et al; Angewandte Chemie (2012) Volume 125, Issue 1, pages 268–283

Entwicklungsstrategie - Bauchemie

Entwicklung reaktiver bauchemischer Verbindungen an mineralischen Grenzflächen

„Target“ -Identifikation: Charakterisierung der mineralischen Grenzflächen

↓

„Screening“: Suche von geeigneten Wirkstoff-Molekülen

↓

Modellierung: Optimierung der ausgewählten Strukturen

↓

Bauchemie: Verfeinerung und Optimierung der Wirkstoffmoleküle

↓

Wirksamkeit und Dauerhaftigkeit: Testen chemischer Strukturen

↓

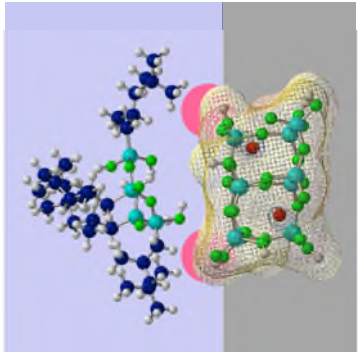
Formulierung der Produkte: Entwicklung Produktsysteme

↓

Testphase: Anwendung auf der Baustelle

↓

Zulassung: lieferbare Produkte

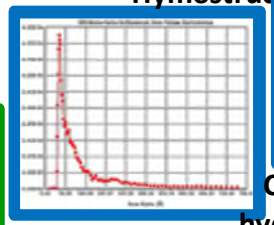


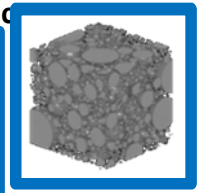
… von Nano zu Makro … – Charakterisierung Mineralischer Grenzflächen

… von Nano zu Makro … - Modellierung Mineralischer Grenzflächen

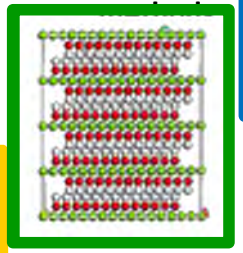
Hymostruc

Non-local-density-functional-theory





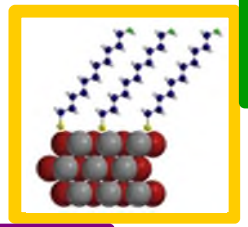
Forcefield-theory methods



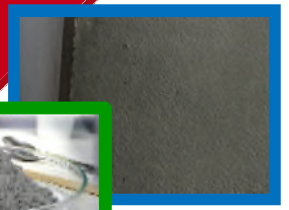
m

Cement based material: hydration, pore structure, properties, fracture mechanics

Semi empirical methods

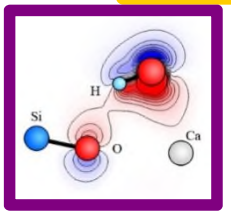


Mineral structure

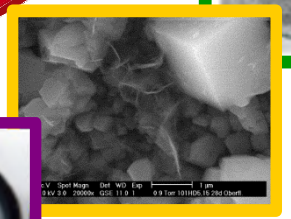


Reactions in the pore space, at the interface

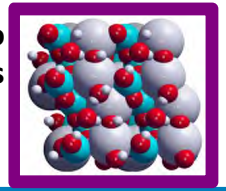
Density functional theory methods



Model substrate



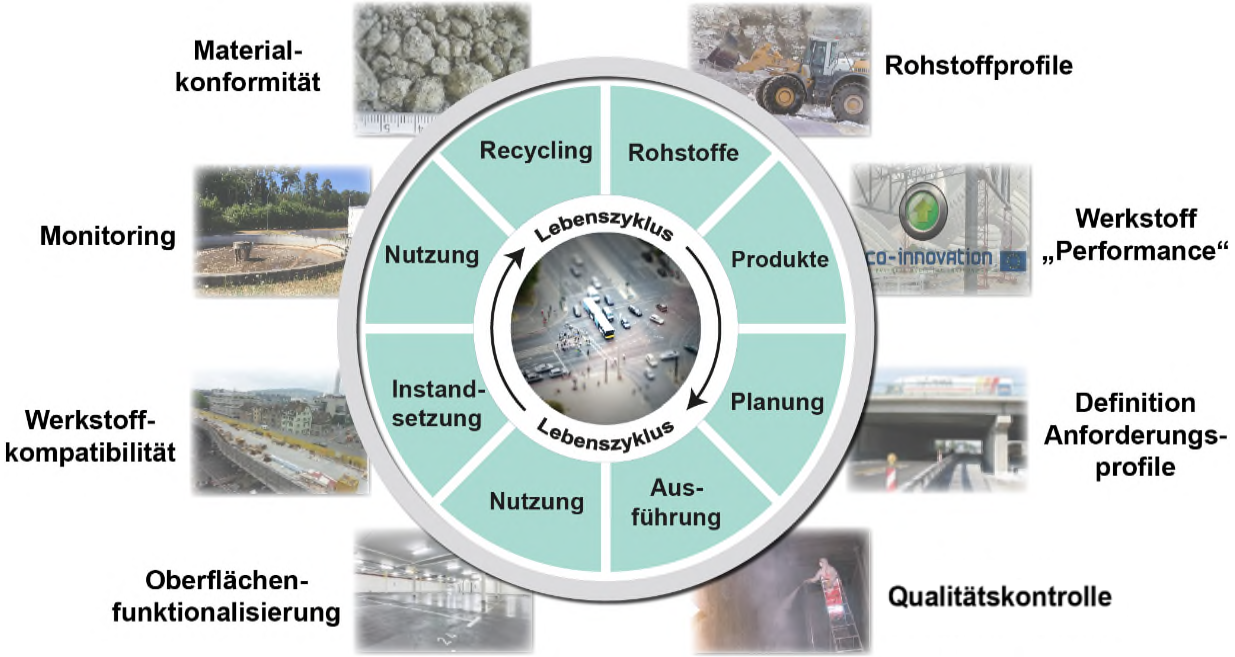
ab initio methods



Å

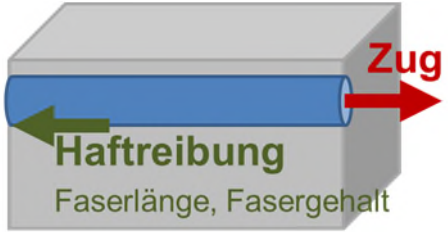
http://www.citg.tudelft.nl/en/about-faculty/departments/structural-engineering/sections/materials-and-environment/microlab/research/hymostruc/image-database/blaine/

Strategischer Ansatz – Verlängerung der *tatsächlichen* Lebensdauer auf die *geplante* Lebensdauer



Wirkungsweise von Fasern

- Dissipation der Bruchenergie durch Haftreibung
- makroskopisch: Steigerung Haftreibung durch längere Fasern und höhere Gehalte
- Grenzen für Anwendungen
- Probleme bei der Anwendung: Igelbildung, Aufschwimmen …
- Ursache: hydrophobe Faseroberflächen



molekularer Ansatz zur Faserpräparation

notwendig: Modifikation und Funktionalisierung der Faseroberflächen

Problem: Anbindung der zur Funktionalisierung eingesetzten Verbindungen

Aufklärung des Zusammenspiels

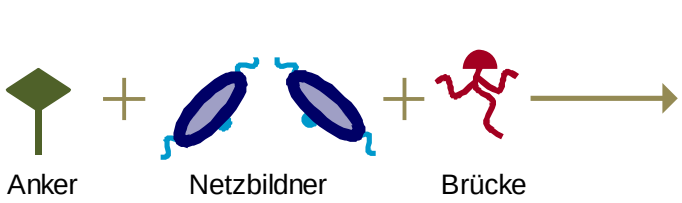
Faseroberflächen-Funktionalisierung ⟷ **makroskopische Werkstoffeigenschaften**

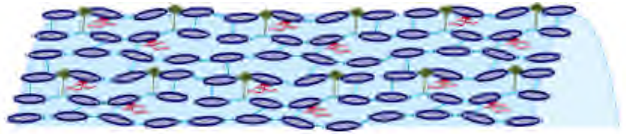
für gezielte Modifikationen

Prinzip Faserpräparation

- kationisches Polymer: Netz
- Vermittler zwischen Faseroberfläche und Polymer: Brücke
- Anorganische Gruppe zur Einbindung in die mineralische Matrix: Anker

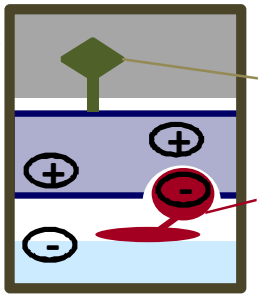
Bausteine für die Präparation





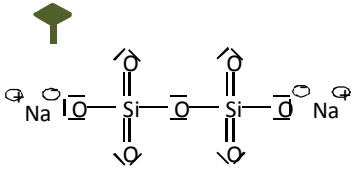
Netz mit Anker und Brücke
zur Faserumhüllung

Querschnitt

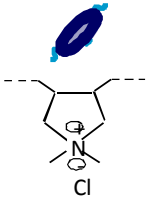


Prinzip Faserpräparation

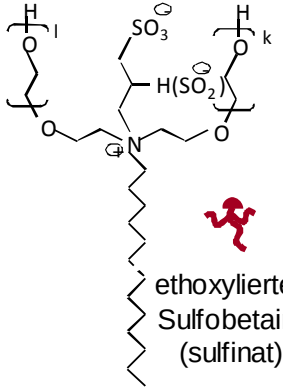
molekulare Ebene



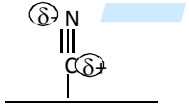
Silikat



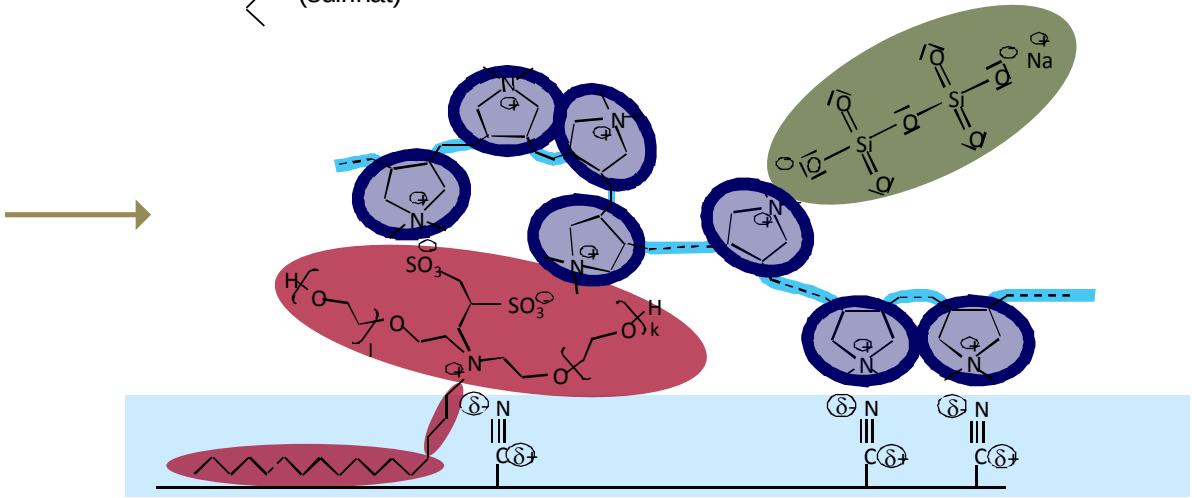
Poly-(dimethyldiallyl-ammoniumchlorid)



ethoxyliertes Sulfobetain-(sulfinat)



Nitrilgruppen



Interaktionen an den Grenzflächen

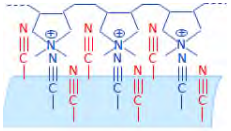
- Herausforderung: beste Kombination Faseroberfläche-Netz-Brücke
  Interaktion Faser/Präparation, Faser/wässrige Lösung, Faser Präparation
  Abstimmung der Bestandteile der Präparationslösung:
  Polyionenkomplex, PK und Tenside

Untersuchung der Interaktionen

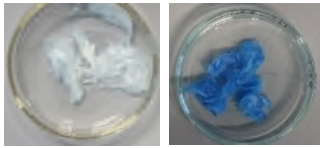
- Infrarotspektrokopisch
  qualitativer Nachweis der Präparation
  Zusammenhang quantitative Auswertung
  mechanische Eigenschaften?

- Visuell
  Färbeversuch

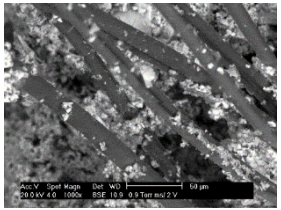
- Mikroskopisch
  Bruchflächen, Rissbildung
  Bündelung bzw. Vereinzelung der Fasern
  Anhaftungen an den Fasern



Faser/Präparation



Faser/wässrige Lösung

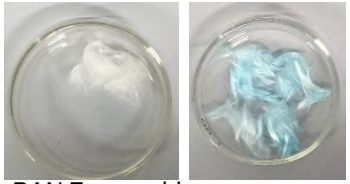


Faser/mineralische Oberfläche

Faserpräparation - Ergebnisse

- Bsp. Polyacrylnitrilfasern:
  Ladungsdomänen auf der Oberfläche
  Präparation ohne Tensid möglich: durch Anfärben keine Unterschiede sichtbar
  IR-Spektren: unabhängig vom Tensid Banden des Polyionenkomplexes sichtbar
  Vereinzelung der Fasern in Gipsproben: keine Büschel bei den mit PK-behandelten Fasern

Färbeversuch PAN-Fasern



PAN Fasern ubh

PAN

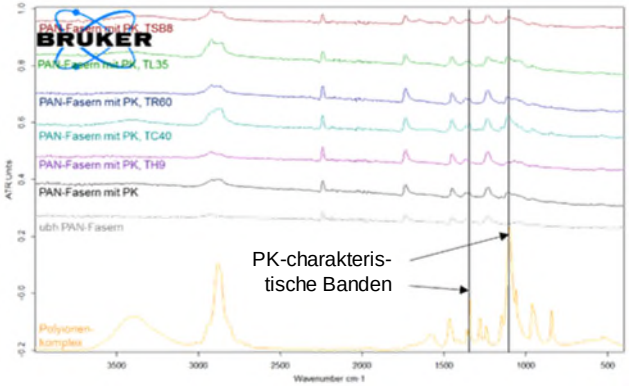
PAN Fasern+PK + TC40

PAN Fasern + PK + TR60

Gipsprobekörper PAN-Fasern

ubh PAN-Fasern

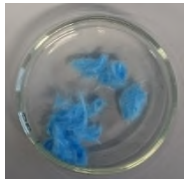
PAN-Fasern + PK



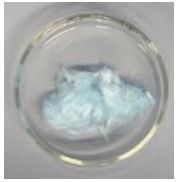
- Bsp.: Polypropylenfasern:
  keine Ladungsdomänen auf der Oberfläche
  starke Abhängigkeit der PK-Anbindung vom Tensid (Anfärbung)
  Anhaftungen an freiliegenden mit PK behandelten Fasern in einer Bruchfläche in Gipsproben

Färbeversuch PP-Fasern

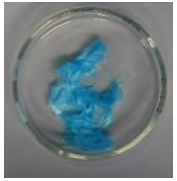
PP Fasern ubh



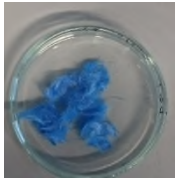
PP Fasern + PK



PP Fasern + PK + TH9



PP Fasern + PK + TL35



PP Fasern + PK + TR60

Gipsprobekörper PP-Fasern

ubh PP-Fasern

PP-Fasern + PK

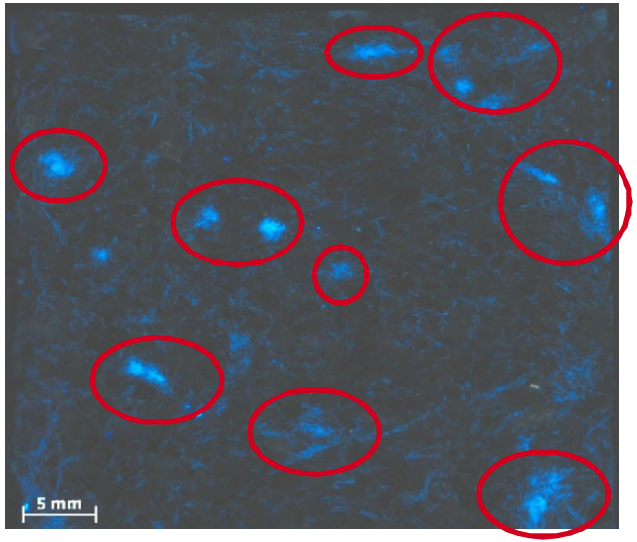
31.01.2018

FUNKTIONALISIERUNG VON POLYMERFASERN

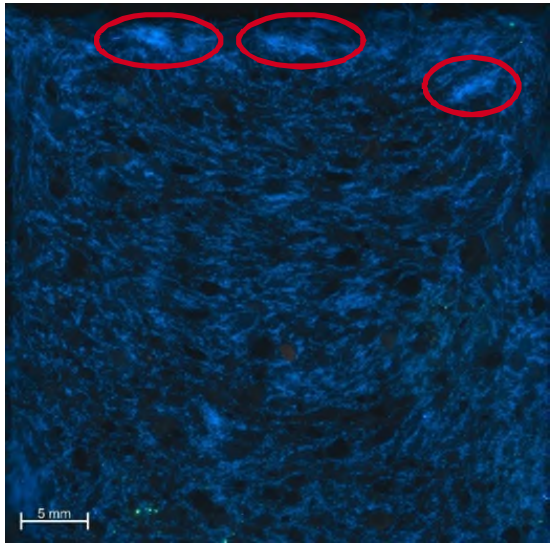
Bautechnologische Untersuchungen in der BAM

Faserverteilung in der Zementmörtel-Matrix

–Lichtmikroskopie mit Fluoreszenzanregung-



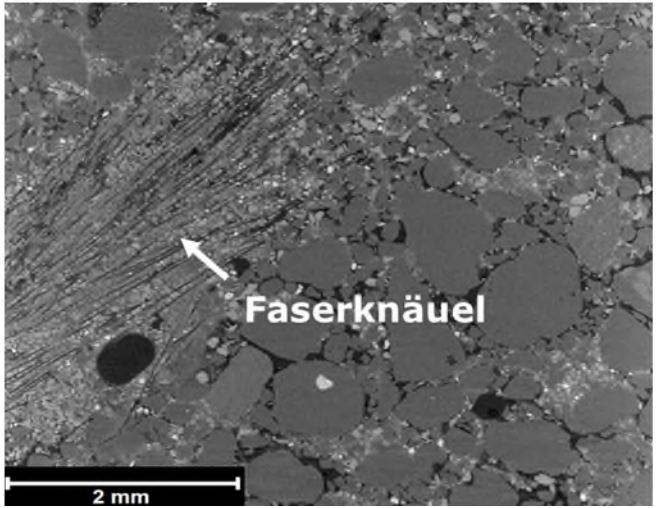
Mörtel A: ausgeprägte Faserknäuel
mit herkömmlichen PAN-Fasern



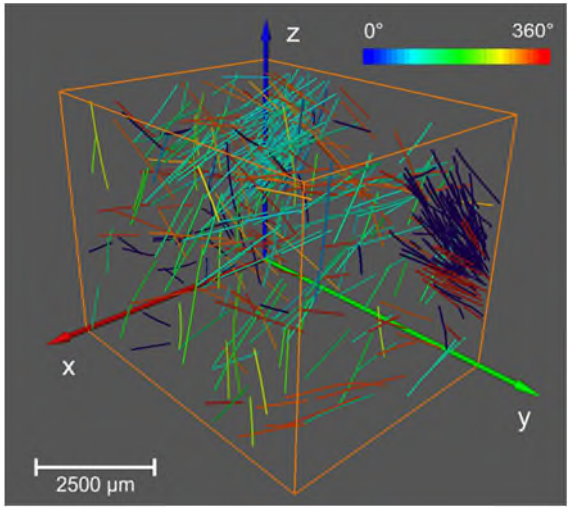
Mörtel B: fast homogene Verteilung
mit funktionalisierten PAN-Fasern

Faserverteilung in der Zementmörtel-Matrix

-3D–Computertomographie-



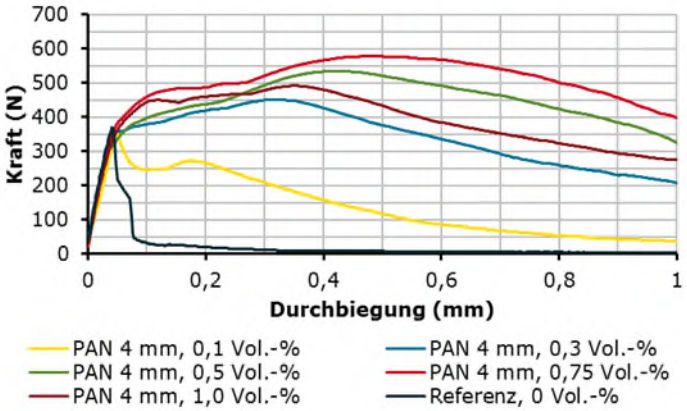
Beispiel eines 2D-Röntgenbilds
als Basis für die Erzeugung eines
tomografischen 3-D-Bildes

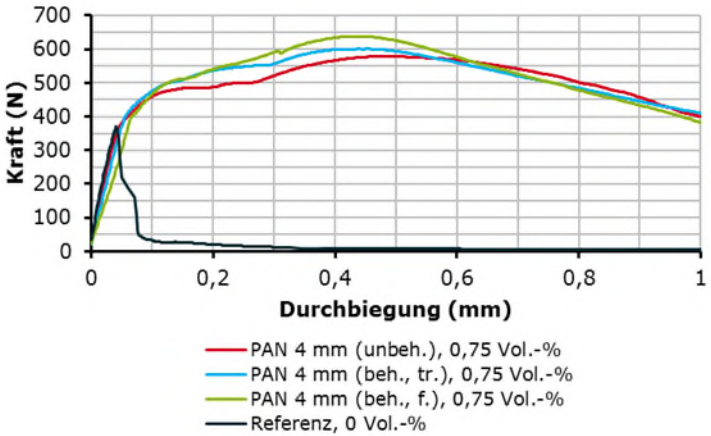


dreidimensionale Faserverteilung
im ausgehärtetem Zementmörtel
mit 0,5 Vol.-% PAN-Fasern (l=4 mm)

Nachrissbiegezugfestigkeit

-Fasergehalt und Einfluss der Modifizierung-





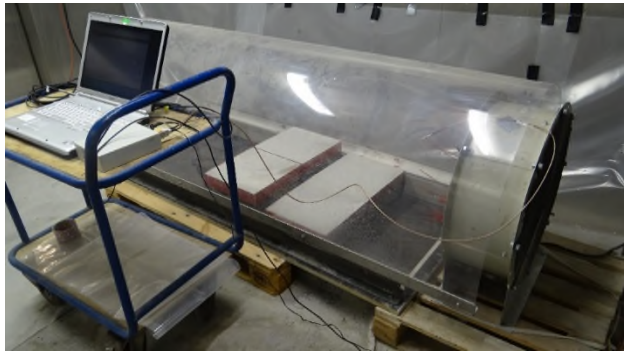
Zementmörtel mit unterschiedlichen Gehalten von unbehandelten PAN-Fasern (l=4 mm):

→ Optimaler Fasergehalt: 0,75 Vol.-%

Zementmörtel mit 0,75 Vol.-% funktionalisierten PAN-Fasern (l = 4 mm):

→ geringfügige Verbesserung des Arbeitsvermögens

Untersuchungen des Schwindverhaltens
-Windkanal-

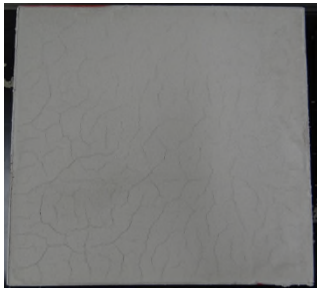


Austrocknung herstellungsfrischer Zementmörtel auf Betonplatten

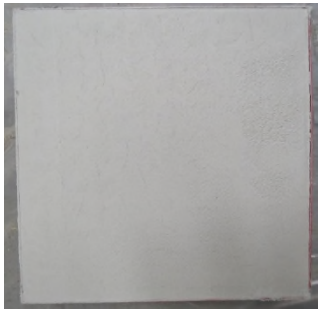
Randbedingungen:

30°C; 50% rel. Luft-

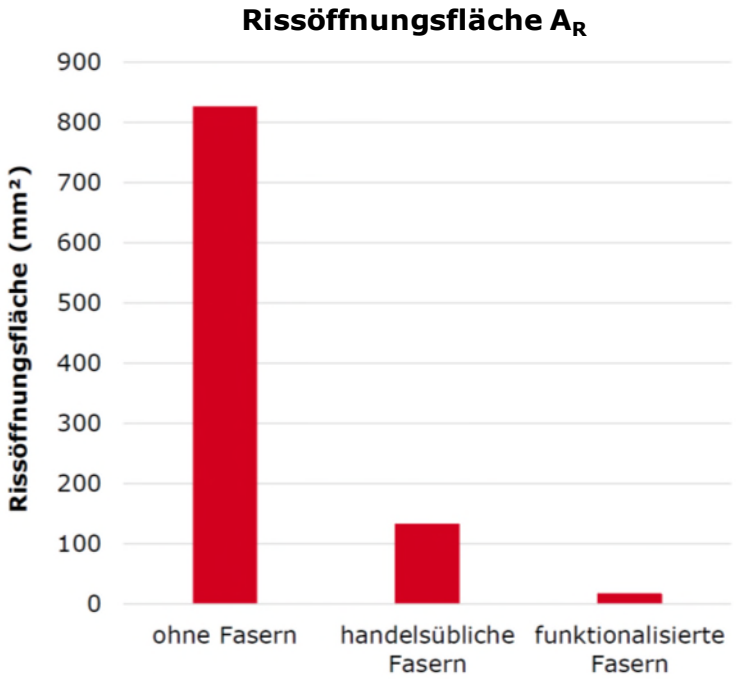
feuchte, Windgeschwindigkeit: 5 m/s



ohne Faserzugabe:
zahlreiche Schwindrisse



PAN-Fasern:
einzelne Schwindrisse



Schlussfolgerungen

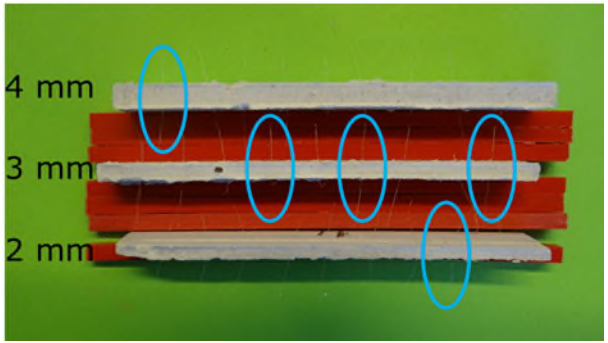
- Eine nachhaltige Infrastruktur hat eine hohe Bedeutung für die wirtschaftliche und gesellschaftliche Entwicklung von Industrie- , Schwellen- und Entwicklungsländern
- Megatrends, wie Klimawandel, Ressourcenverknappung und Digitalisierung werden das Bauwesen stark verändern.
- Für die Entwicklung neuartiger bauchemischer Produkte und Technologien werden Methoden der Hochleistungsanalytik und computerchemische Modellierungen von Bedeutung sein.
- Ein erste Umsetzung dieses neuen Ansatzes ist die Entwicklung von bauchemischen Reagenzien für die Faserfunktionalisierung.
- Die Ergebnisse zeigen, dass die Funktionalisierung der Fasern zu einer deutlichen Verbesserung der Faserverteilung im Werkstoff führt.
- Das bruchmechanische Verhalten der mit modifizierten PAN-Fasern hergestellten Mörtel wird erwartungsgemäß nur geringfügig verbessert.
- Die ersten Ergebnisse zeigen, dass das Schwindverhalten auch im Vergleich zu unbehandelten Fasern gleichen Typs signifikant verbessert werden.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

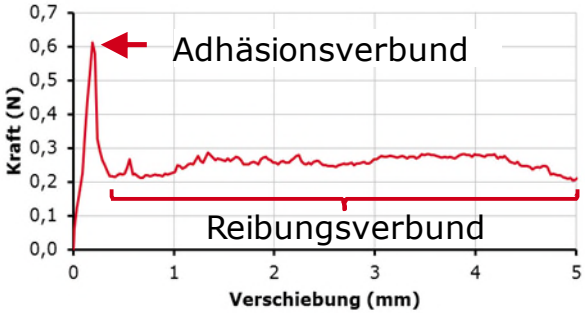
GEFÖRDERT VOM

Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Verbund zwischen Faser und Zementmörtelmatrix -
Einzelfaserdurchzug-



Probekörper unterschiedlicher Dicke mit einzeln eingebetteten Fasern



Charakteristische Kraft-Verschiebungs-kurve für eine PAN-Faser (Einbetttiefe: 4 mm)

→ Einfluss der Oberflächenmodifizierung nicht nachweisbar